

ニューラルネットワークポテンシャル

岡野原 大輔

高次元関数のモデル化

原子がどのように並んだり動いたりするかを計算で予測する手法は**分子動力学計算**（Molecular Dynamics 計算＝**MD 計算**）とよばれる。分子動力学計算を行うことで、物質の物理的性質や化学的性質の多くを予測することができる。この際に問題となるのは、原子の振舞いを決定するためのポテンシャルとよばれる関数である。量子化学計算を使えばポテンシャル関数を高精度に予測できるが、その計算負荷は非常に大きい。そのため、大規模な系や長時間のシミュレーションには適用が難しい。代表的な手法である**密度汎関数理論**（Density Functional Theory＝**DFT**）は、分子や結晶の電子密度を計算し、エネルギーや物性を求める手法である。しかし、数百から数千個の原子を含む系を対象とする場合、高速な計算機を用いても1回のシミュレーションに数時間から数日を要することがある（DFTの計算量は原子数の増加に対し3乗で増えるので、計算機がどれだけ高速になっても大規模な系を高速に解くことは容易でない）。

この問題に対し、原子構造からエネルギーを直接計算する**原子間ポテンシャル**が考えられた。従来は特定の物質ごとに実験値を再現するよう個別に関数形状が設計されており、経験ポテンシャルとよばれていた。近年、ニューラルネットワークを関数に利用した**ニューラルネットワークポテンシャル**（Neural Network Potential＝**NNP**）の利用が広がっている。これらはDFTをはじめとする量子化学計算の結果を学習データとして利用し、ニューラルネットワークを学習させることで、新しい分子や結晶のエネルギーやそれに紐づく物性を高速に予測する手法である（図1）。

初期のNNPは学習時に特定の系のみのデータを使うとされていたが、学習データの改善やモデルの改良が進んだことで、汎用的な利用が可能となった。たとえばMatlantis*は96種類の元素の組み合わせに対応し、数千から数万個

の原子を含む系にも適用できる。こうした汎用NNPは従来できそうでできなかった「高校レベルの化学の重要な量的特徴を再現できる」（文献1）。

特に、計算負荷の大きい分子動力学シミュレーションや材料設計の分野では、NNPが従来手法を補完あるいは置き換えるかたちで利用されている。これにより、計算化学の適用範囲が大幅に拡大している。

NNPが高速な計算を実現できる理由は次のとおりである。量子化学計算を経由してエネルギーを求める場合、電子状態を計算するために電子の多体問題を解く必要があるが、本質的に計算量が大きい対角化や逐次計算などが必要となる。これに対し、ニューラルネットワークポテンシャルは電子状態については計算せず、電子状態から求められる一つの量である系のエネルギーだけを求める。原子構造とエネルギーとの対応関係は複雑なものになるが、ニューラルネットワークがその関係を捉え、一度訓練が完了すれば、入力を与えるだけでエネルギーを即座に出力できる（計算量は入力原子数に比例する程度である）。これは、

* 筆者はMatlantisを提供するPFCCの代表を務めている。

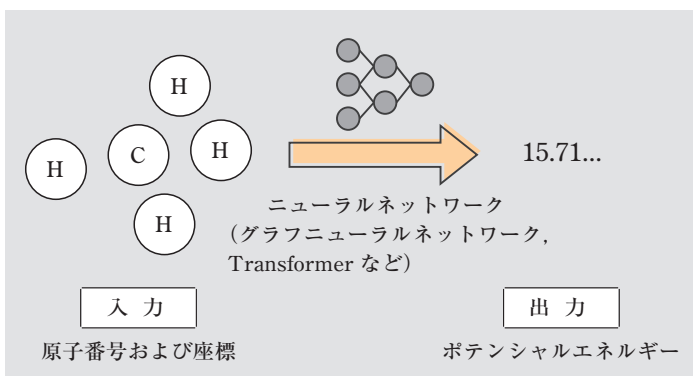


図1 ニューラルネットワークポテンシャル

ニューラルネットワークが原子構造からエネルギーへの複雑な非線形関数を効率的に近似し、学習データをコンパクトに圧縮し、それを参照しているといってもよい。

NNPは系の配座情報を入力としエネルギーを出力する高次元関数を学習する。そして、新しい入力に対しては、その関数を内挿するかたちで予測を行う。ただし、この内挿はニューラルネットワーク内部の表現空間で行われる。言語データや画像データにおけるAIの発展を考えれば、現在のAIがもつ内挿能力の強力は想像できるだろう。

ニューラルネットワークポテンシャルの仕組み

原子間ポテンシャルは原子構造（分子や結晶など）を入力としエネルギーや力を予測する関数である。この関数をニューラルネットワークでモデル化したのがニューラルネットワークポテンシャル（NNP）である。

NNPは入力として各原子の原子番号とその座標を受取り、エネルギー（原子間ポテンシャル）を出力する。学習時にはDFTなどで計算された正解のエネルギーや力を予測できるように学習する。力はエネルギーの座標についての1次微分であり、同じ情報であるが、モデルの学習を促進させることが知られている。

NNPで用いられるニューラルネットワークは物理的に妥当な予測を行うために、以下の1~5に記したようなさまざまな制約を考慮するよう設計されている。これらの制約が満たされないとシミュレーション中にエネルギーが保存されず原子構造が破綻してしまったり、視点を変えるなど物理的に影響のない操作でシミュレーションの振舞いが変わってしまう不具合が生じる。

1. 置換不変性

順序が重要な言語データなどと違って、原子構造はデータ上で表現されている原子の順番自体に物理的な意味はな

く、これらの原子の順序が入替わっても、系のエネルギーは変化しない。いわゆる置換不変性が成り立つ。これを保証するために、グラフニューラルネットワーク（GNN）やTransformerなどの置換不変なモデルが用いられる。

2. 並進・回転対称性

エネルギーは、座標系のとり方に依存しないため、並進移動や回転によって変化しない。一方で力はベクトル量であり、入力が回転すれば出力も同じように回転する必要がある。これを**共変性・同変性**とよぶ。

3. エネルギーの加法性

相互作用しない二つの系を結合した場合、そのエネルギーはそれぞれの系のエネルギーの和として表される保証がある。

4. エネルギー関数の滑らかさ

物理的に妥当なポテンシャルエネルギーは、高次の微分をとっても滑らかであることが求められる。これを保証するため、モデル内部の非線形関数にはそのような制約をもった関数が採用される。

5. エネルギーと力の対応

原子に働く力は常にエネルギーの座標についての勾配として表される。これを満たすために、たとえば、力を予測する際に、エネルギーを予測するニューラルネットワークの入力についての勾配を使って予測する。

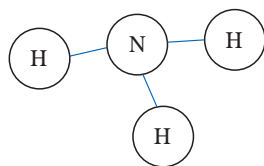
学習データ

NNPの性能は、使用する学習データの質と量に大きく依存する。単にデータを増やすだけでなく、すべては網羅できないので適切なデータを選択することが重要である。まずデータの多様性が重要である。さらには安定した分子や結晶構造のみを学習データとした場合、非安定構造の予測精度が著しく低下することが知られており、MDシミュ

置換不変性

原子の入力順序が変わっても結果は一致する

たとえば、[N H H] と [H N H] と [H H N]（座標省略）の推定結果が一致する



実現例
近傍原子をつなげたグラフ上で
情報を伝播させるグラフニューラルネットワーク

図2 ニューラルネットワークの制約 1

並進・回転対称性

系が並進したり回転した場合、エネルギーは一致する
力（ベクトル量）は一緒に回転する

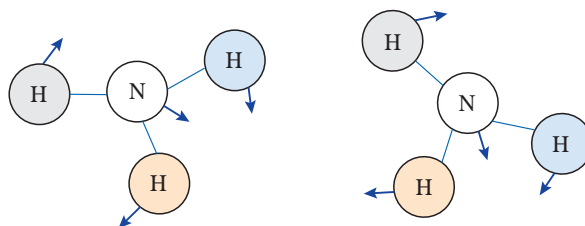


図2 ニューラルネットワークの制約 2

レーションの際に破綻する問題が発生する。シミュレーションでは数百万回といったオーダーで予測が参照されるため、モデルの振舞いに対する要求が格段に高くなる。

また、学習データ自体の精度も重要である。NNPの学習データには、通常DFTの計算結果が用いられる。しかし、DFTは交換相関汎関数（以下汎関数）の選択によって精度が大きく変化する。問題に応じて高精度な汎関数を用いたり、DFTより高精度な手法（CCSD(T) など）で得られたデータを学習に用いる試みも進められている。DFTの汎関数の精度向上に機械学習を使う試みはのちの回で説明する。

応 用 例

NNPは材料科学を中心に、幅広い応用が進められている。従来のMDシミュレーションでは、分子間ポテンシャルを事前に定義する必要があるが、新しい系に対する適用が制限されていた。しかし汎用NNPを用いることで、未知の原子構造からなる物質の複合的な構造を容易に解析することが可能となった。

また、NNPは新規材料の設計や既存材料の特性評価においても強力なツールとなっている。たとえば従来の手法では、多くの元素が含まれる結晶構造のエネルギーを正確に予測することが困難であったが、NNPの導入により、こうした場合の新規結晶構造を計算から予測することが現実的となった。さらにはイオンの拡散挙動、相転移、高温高压条件での材料の挙動の解析などに応用されている。

さらに、NNPは触媒上の化学反応のような複雑で不安定な原子構造を含む現象についても定量的な再現が可能であると報告されている。これより、NNPを活用した高速な反応経路解析による網羅的な探索を行い、その結果を新しい触媒設計に用いたり、反応条件の最適化などが試されている。

NNPの今後

NNPは近年、さまざまな手法が開発され、その応用範囲が広がりつつある（NNPの歴史や最近の発展は文献2に詳しい）。一方、NNPは依然として用途特化や利用時のファインチューニングを前提とした研究が多いが、今後は汎用的なNNP開発が進むと考えられる。Matlantisなどはそうしたファインチューニングを必要としないNNPである。

新しい活用法が広がるなかで、依然として解決すべき課題も多い。

一つ目は、NNPは量子化学計算を大幅に高速化したが、それでも計算速度の向上に対する需要は引き続き大きいこと。こうしたなかでNNPはパレート曲線のように精度と速度のトレードオフが存在する（文献3参照）。より大規模な原子数や長時間のシミュレーションが求められるなかで、NNPの計算効率のさらなる向上が重要な課題となっている。

近年エネルギーだけでなく電子状態や関連する物性を推定する試みが進められている。今後のシリーズでもこの話題は取扱う。大規模言語モデルが次の単語予測を大量にこなすことで文章を理解できるようになったのと同様に、NNPも大量のエネルギーを推定できるようにするなかでNNPの内部状態には電子状態の推定に必要な状態が含まれていると考えられている。課題の二つ目は、こうした情報を活用することで、電子状態や関連する物性を推定する、もしくは少ない学習データで学習できるようになることである。

三つ目はほかのAI技術との融合である。特に新しい分子構造の設計や未発見の材料探索をAIが補助するような生成モデルとの統合や、最適な材料設計プロセスを探索するような強化学習手法との組み合わせなどは登場してくるだろう。

四つ目は計算化学の裾野を広げていく活動である。従来、大規模なシミュレーションには大規模な計算リソースが必要だったが、NNPを活用することで、高性能な計算リソースをもたない研究者や教育機関でも高度なシミュレーションが実施可能となる。これにより、研究の発展だけでなく、教育の分野にも大きな影響を与えられる。

NNPは多岐にわたる応用が期待される。本記事が示したように、NNPはすでに実用化が急速に進んでおり、今後の発展が見込まれる。今後はNNPをどのように活用するかが重要な課題となるだろう。

参 考 文 献

1. S. Takamoto ほか, *J. Materiomics*, 9, 447 (2023).
2. R. Jacobs ほか, *Curr. Opin. Solid State Mater. Sci.*, 35, 101214 (2025).
3. Y. Zuo ほか, *J. Phys. Chem. A*, 124, 731 (2020).